

ЗАВИСИМОСТЬ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ ОТ Р-Т-УСЛОВИЙ И РАЗМЕРА НАНОКРИСТАЛЛА

Магомедов М.Н.

*ИПГВЭ ОИВТ РАН, Махачкала, Россия
mahmag4@mail.ru*

Нами ранее в [1] было рассчитано уравнение состояния и свойства макрокристалла ГЦК золота. В данной работе изменение свойств золота при переходе от макро- к нано-кристаллу было изучено на основе метода из [1], который был обобщен на нанокристалл из N атомов. Данное обобщение было сделано на основе RP-модели [2], которая позволяет изучать зависимость свойств как от N , так и от формы нанокристалла в виде прямоугольного параллелепипеда.

В данной работе были рассчитаны следующие свойства: σ — удельная поверхностная энергия грани (100), $\sigma'(P)_T = (\partial\sigma/\partial P)_T$ — производная функции σ по давлению, изохорная ($\sigma'(T)_v = (\partial\sigma/\partial T)_v$) и изобарная ($\sigma'(T)_P = (\partial\sigma/\partial T)_P$) производные функции σ по температуре. Было изучено изменение этих свойств при переходе от макро-ГЦК-Аи к нанокристаллу кубической формы из 306 атомов.

Было показано, что при $P = 0$ величина σ уменьшается с уменьшением N тем заметнее, чем выше температура. При низких температурах и высоких давлениях на изотерме имеются две Р-точки, в которых удельная поверхностная энергия не зависит от N . С ростом температуры эти Р-точки сближаются, и при высоких температурах таких Р-точек на изотерме уже нет. В области, оконтуренной Р-точками величина σ возрастает при изотермо-изобарном уменьшении N .

Изотермы барической зависимости функции $\sigma'(P)_T$ для макро- и нано-кристалла при определенном давлении (P_x) пересекаются. При $P < P_x$ функция $\sigma'(P)_T$ растет при изотермо-изобарическом уменьшении N , а при $P > P_x$ функция $\sigma'(P)_T$ уменьшается.

Показано, что при $T = 0$ К функции $\sigma'(T)_v$ и $\sigma'(T)_P$ при любом давлении достигают своего максимума: $\sigma'(T)_v = \sigma'(T)_P = 0$. При низких давлениях выполняется $|\sigma'(T)_v| < |\sigma'(T)_P|$. Однако при высоких давлениях это неравенство меняется на противоположное. При изобарном или изотермическом переходе к нанокристаллу величины $|\sigma'(T)_v|$ и $|\sigma'(T)_P|$ возрастают.

-
1. M.N. Magomedov, Computational Condensed Matter, 2022, 31, e00673. DOI: 10.1016/j.cocom.2022.e00673
 2. M.N. Magomedov, Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2021, 151, 109905. DOI: 10.1016/j.jpics.2020.109905